



TITLE:

Runge-Kutta型5段5次と6段6次の極限公式と数値的に同じ精度の微係数を用いない公式(並列数値計算アルゴリズムとその周辺)

AUTHOR(S):

小野, 令美; 戸田, 英雄

CITATION:

小野, 令美 ...[et al]. Runge-Kutta型5段5次と6段6次の極限公式と数値的に同じ精度の微係数を用いない公式(並列数値計算アルゴリズムとその周辺). 数理解析研究所講究録 1984, 514: 258-282

ISSUE DATE:

1984-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/98359>

RIGHT:

Runge-Kutta型 5 段 5 次と 6 段 6 次の極限公式と
数値的に同じ精度の微係数を用いない公式

都立農芸高 小野令美 (Harumi Ono)

千葉大・工 戸田英雄 (Hideo Toda)

1. まえがき

常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$$

の Kutta 型¹⁾ p 段公式

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^p \mu_i k_i$$

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_i = h f(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad (i=2, 3, \dots, p)$$

において, よく知られているように, $p \geq 5$ では $O(h^p)$ までの局所打ち切り誤差を 0 とする p 次公式は得られないが, $p=5, 6$ の場合 f_x と f_y を用いれば 5 段 5 次と 6 段 6 次の極限公式 が導かれる^{2), 3)}. さらに, $O(h^p)$ の誤差項は完全に 0 でなくても, $O(h^{p+1})$ の誤差項に比べて無視できる程度に小さければよいという考えにたち, 極限公式で微係数を用いて求める値の有効

桁数は少くてよいことから，一部式変形を行えば p 段公式のまま p 次の極限公式とほぼ同じ精度の 実質的 5 段 5 次と 6 段 6 次の公式 が得られる^{4), 3)}。しかし，公式の係数は極端に桁数の多い有理数となる。

そこで，極限公式のまま微係数だけを数値微分でおきかえ，数値微分の誤差を公式の $O(h^p)$ の誤差に比べて無視できる程度に小さくした， 5 段 5 次型と 6 段 6 次型公式 を導く。
 5 段極限公式， $\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j = \alpha_i^2/2$ で $\mu_2=0$ の 6 段極限公式はほかにはなく， $O(h^p)$ の誤差項の係数は最良となるように自由なパラメタを選んであるので，打切り誤差に関しては 5 段公式および $\sum \beta_{ij} \alpha_j = \alpha_i^2/2$ で $\mu_2=0$ の 6 段公式の中で最良のものである。

2. Kutta の条件式

2.1 $O(h^4)$ までの誤差項の係数を 0 とおいた方程式：

$$\sum_{i=1}^p \mu_i = 1 \quad (2.1)$$

$$\sum_{i=2}^p \mu_i \alpha_i = \frac{1}{2} \quad (2.2)$$

$$\sum_{i=2}^p \mu_i \alpha_i^2 = \frac{1}{3} \quad (2.3)$$

$$\sum_{i=3}^p \mu_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j = \frac{1}{6} \quad (2.4)$$

$$\sum_{i=2}^p \mu_i \alpha_i^3 = \frac{1}{4} \quad (2.5)$$

$$\sum_{i=3}^p \mu_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 = \frac{1}{12} \quad (2.6)$$

$$\sum_{i=3}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j = \frac{1}{8} \quad (2.7)$$

$$\sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k = \frac{1}{24} \quad (2.8)$$

2.2 $O(h^5)$ の誤差項の係数:

$$\delta_{51} = \frac{1}{24} \left(\sum_{i=2}^p \mu_i \alpha_i^4 - \frac{1}{5} \right)$$

$$\delta_{52} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \alpha_i^2 \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j - \frac{1}{10} \right)$$

$$\delta_{53} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 - \frac{1}{15} \right)$$

$$\delta_{54} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 - \frac{1}{60} \right)$$

$$\delta_{55} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right)^2 - \frac{1}{20} \right)$$

$$\delta_{56} = \sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k + \sum_{i=4}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k - \frac{7}{120}$$

$$\delta_{57} = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^3 - \frac{1}{20} \right)$$

$$\delta_{58} = \sum_{i=5}^p \mu_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l - \frac{1}{120}$$

2.3 $O(h^6)$ の誤差項の係数:

$$\delta_{61} = \frac{1}{120} \left(\sum_{i=2}^p \mu_i \alpha_i^5 - \frac{1}{6} \right)$$

$$\delta_{62} = \frac{1}{24} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^4 - \frac{1}{30} \right)$$

$$\delta_{63} = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^3 - \frac{1}{120} \right)$$

$$\delta_{64} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=5}^p \mu_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l^2 - \frac{1}{360} \right)$$

$$\delta_{65} = \sum_{i=6}^p \mu_i \sum_{j=5}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=4}^{j-1} \beta_{jk} \sum_{l=3}^{k-1} \beta_{kl} \sum_{m=2}^{l-1} \beta_{lm} \alpha_m - \frac{1}{720}$$

$$\delta_{66} = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^3 - \frac{1}{24} \right)$$

$$\delta_{67} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 + \sum_{i=4}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 - \frac{1}{40} \right)$$

$$\delta_{68} = \sum_{i=5}^p \mu_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l + \sum_{i=5}^p \mu_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=5}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l - \frac{1}{60} \\
\delta_{69} &= \frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \alpha_i^3 \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j - \frac{1}{12} \right) \\
\delta_{610} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k + \sum_{i=4}^p \mu_i \alpha_i^2 \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k - \frac{2}{45} \right) \\
\delta_{611} &= \frac{1}{4} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \alpha_i^2 \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 - \frac{1}{18} \right) \\
\delta_{612} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right) \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \right) - \frac{1}{36} \right) \\
\delta_{613} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \right)^2 + 2 \sum_{i=4}^p \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right) \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \right) - \frac{13}{360} \right) \\
\delta_{614} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^p \mu_i \alpha_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right)^2 - \frac{1}{24} \right) \\
\delta_{615} &= \sum_{i=4}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k - \frac{1}{48}
\end{aligned}$$

3. 5段公式

3.1 $p=5$ の場合の条件式と解.

$O(h^4)$ までの誤差項の係数を 0 とおいた方程式を適当に組合せて整理する. それに Kutta の条件式が f と無関係に成り立つための式:

$$\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} = \alpha_i, \quad (i=2, \dots, 5) \quad (3.1)$$

$$\sum_{i=1}^5 \mu_i = 1 \quad (3.2)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ \alpha_2^2 & \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 \\ \alpha_2^3 & \alpha_3^3 & \alpha_4^3 & \alpha_5^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2) & \alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2) \\ c_3 & c_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_3 \\ T_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1-2\alpha_2}{12} \\ \frac{1}{24} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_3 C_3 \\ \mu_4 C_4 \\ \mu_5 C_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{8} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

ここで, $C_i = \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j$, ($i=3, 4, 5$), $T_3 = \mu_4 \beta_{43} + \mu_5 \beta_{53}$, $T_4 = \mu_5 \beta_{54}$ である.
 (3.2), (3.3)から μ_i はいずれか一つの μ と α_i で表わされ, (3.4),
 (3.5)から T_i , C_i は, C_i の一つ, たとえば C_5 , と α_i を用いて次のように表わされる.

$$\mu_3 C_3 = \frac{1}{\alpha_4 - \alpha_3} \left(\frac{4\alpha_4 - 3}{24} + \mu_5 (\alpha_5 - \alpha_4) C_5 \right)$$

$$\mu_4 C_4 = \frac{-1}{\alpha_4 - \alpha_3} \left(\frac{4\alpha_3 - 3}{24} + \mu_5 (\alpha_5 - \alpha_3) C_5 \right)$$

$$T_3 = \frac{1}{\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2) C_4 - \alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2) C_3} \left(\frac{C_4(1 - 2\alpha_2)}{12} - \frac{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)}{24} \right)$$

$$T_4 = \frac{-1}{\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2) C_4 - \alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2) C_3} \left(\frac{C_3(1 - 2\alpha_2)}{12} - \frac{\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)}{24} \right)$$

自由なパラメータは $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$, μ_i のうちのの一つ, C_5 , それに,
 $\beta_{42}, \beta_{43}, \beta_{52}, \beta_{53}$ のうちのの一つ, の計7個である.

3.2 5次の極限公式

δ_{5i} に上の解を代入する. δ_{5i} は μ_i の一つと α_i だけの式なので, $\delta_{5i} = 0$ となるように自由なパラメータの μ を決める. すると μ_i は次のように決まる.

$$\mu_i = \frac{-g_{ijkl}}{60 \alpha_i \prod_{j \neq i} (\alpha_i - \alpha_j)}, \quad (i=2, 3, 4, 5)$$

ただし

$$g_{ijkl} = 30 \alpha_j \alpha_k \alpha_l - 20 (\alpha_k \alpha_l + \alpha_j \alpha_l + \alpha_j \alpha_k) + 15 (\alpha_j + \alpha_k + \alpha_l) - 12, \quad \left(\begin{matrix} j, k, l = 2, 3, 4, 5 \\ \neq i \end{matrix} \right)$$

δ_{52} にこの μ の値を代入すると, C_5 の 1 次式となるので,
 $\delta_{52}=0$ となるように C_5 を決める:

$$C_5 = \frac{-\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_2)(20\alpha_3\alpha_4 - 15(\alpha_3 + \alpha_4) + 12)}{2g_{234}}$$

この C_5 を C_3, C_4, T_3, T_4 に代入すると, $\delta_{53}, \delta_{54}, \delta_{56}, \delta_{58}$ は β_{43} の 1 次式, δ_{55} は C_5 の 2 次式となる. δ_{56} は連立型の場合二つに分れるので, $\delta_{53}, \delta_{54}, \delta_{58}$ を 0 とおいて得られる β_{43} を等しいとおくと, α_i に関する次の二つの条件式 (3.6) が得られる:

$$\begin{cases} (\alpha_5 - 1)((100\alpha_4\alpha_5 - 75(\alpha_4 + \alpha_5) + 60)\alpha_2 - (50\alpha_4\alpha_5 - 40(\alpha_4 + \alpha_5) + 33)) = 0 \\ \alpha_2(8\alpha_4\alpha_5 - 7(\alpha_4 + \alpha_5) + 6) = 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

また, δ_{57} は α_i だけの式

$$\delta_{57} = \frac{1 - \alpha_5}{360(10\alpha_5^2 - 12\alpha_5 + 3)} \cdot \{300\alpha_2\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 200(\alpha_3\alpha_4\alpha_5 + \alpha_2\alpha_4\alpha_5 + \alpha_2\alpha_3\alpha_5 + \alpha_2\alpha_3\alpha_4) + 150(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_2\alpha_4 + \alpha_2\alpha_5 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_3\alpha_5 + \alpha_4\alpha_5) - 120(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) + 99\}$$

となり, δ_{56} は (3.6) の条件がみたされているとき,

$$\begin{aligned} \delta_{56} = & \frac{(\alpha_5 - 1)(200\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 150(\alpha_4\alpha_5 + \alpha_3\alpha_5 + \alpha_3\alpha_4) + 120(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 99)}{120(10\alpha_5^2 - 12\alpha_5 + 3)} \\ & + \frac{(\alpha_5 - 1)(50\alpha_4\alpha_5 - 40(\alpha_4 + \alpha_5) + 33)}{120(10\alpha_4\alpha_5 - 10(\alpha_4 + \alpha_5) + 9)} \end{aligned}$$

となる. 以上から, (3.6) の条件をみたし, $\delta_{56}=0, \delta_{57}=0$ となるのは次の場合に限ることが導かれる.

i) $\alpha_2=0$ のとき $\alpha_5=1$

ii) $\alpha_2 \neq 0$ のとき $\alpha_5=1$ かつ $\alpha_4=1$

いずれの場合も $\alpha_5=1$ なので, これと代入すると δ_{55} は

$$\delta_{55} = \frac{-\alpha_2^2 (10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)}{96 (10\alpha_2\alpha_3 - 5(\alpha_2 + \alpha_3) + 3)(10\alpha_2\alpha_4 - 5(\alpha_2 + \alpha_4) + 3) g_{234}}$$

$$\times (70\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 30(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_2\alpha_4 + \alpha_2\alpha_3) + 15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 9)$$

となる。従って i) の場合は 0 となり, ii) の場合は

$$\text{ii)-1} \quad 5\alpha_3 - 2 = 0$$

$$\text{ii)-2} \quad 40\alpha_2\alpha_3 - 15(\alpha_2 + \alpha_3) + 6 = 0$$

のとき 0 となることがわかる。i), ii)-1, ii)-2 のいずれの場合も, i) は $\alpha_2 \rightarrow 0$, ii) は $\alpha_4 \rightarrow 1$ の極限で考えた, 微係数を用いる極限公式となる。三種の極限公式のうち $O(h^6)$ の誤項の係数からみて最良の公式は次のものである。²⁾

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = h f(x_n, y_n) \\ K_2 = h^2 (f_x + f \cdot f_y) \\ k_3 = h f(x_n + \alpha_3 h, y_n + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 + \beta_{32}\alpha_2 K_2) \\ k_4 = h f(x_n + \alpha_4 h, y_n + (\beta_{41} + \beta_{42})k_1 + \beta_{42}\alpha_2 K_2 + \beta_{43}k_3) \\ k_5 = h f(x_n + h, y_n + (\beta_{51} + \beta_{52})k_1 + \beta_{52}\alpha_2 K_2 + \beta_{53}k_3 + \beta_{54}k_4) \\ y_{n+1} = y_n + (\mu_1 + \mu_2)k_1 + \mu_2\alpha_2 K_2 + \mu_3k_3 + \mu_4k_4 + \mu_5k_5 \end{array} \right. \quad (3.7)$$

ここで, 係数は次の通りである。

$$\alpha_3 = \frac{1}{2}, \beta_{31} + \beta_{32} = \frac{1}{2}, \beta_{32}\alpha_2 = \frac{1}{8}$$

$$\alpha_4 = \frac{5}{9}, \beta_{41} + \beta_{42} = \frac{305}{729}, \beta_{42}\alpha_2 = \frac{125}{1458}, \beta_{43} = \frac{100}{729}$$

$$\beta_{51} + \beta_{52} = \frac{359}{775}, \beta_{52}\alpha_2 = \frac{7}{310}, \beta_{53} = -\frac{100}{31}, \beta_{54} = \frac{2916}{775}$$

$$\mu_1 + \mu_2 = \frac{233}{750}, \mu_2\alpha_2 = \frac{3}{100}, \mu_3 = -\frac{8}{15}, \mu_4 = \frac{2187}{2000}, \mu_5 = \frac{31}{240}$$

3.3 微係数を用いない5段5次型公式.

(3.7)の K_2 に必要な導関数 f_x と f_y の計算の代りに, k_2 の関数計算を行い, 次のように数値微分で代用する. すなわち,

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f(x_n + \varepsilon h, y_n + \varepsilon k_1)$$

を計算し, K_2 の値として

$$\hat{K}_2 = \frac{k_2 - k_1}{\varepsilon}$$

を用いる. このとき

$$\begin{aligned} k_2 &= h f(x + \varepsilon h, y + \varepsilon k_1) \\ &= h \left[f + \varepsilon h (f_x + f \cdot f_y) + \frac{(\varepsilon h)^2}{2!} (f_{xx} + 2f \cdot f_{xy} + f^2 f_{yy}) + \dots \right] \end{aligned}$$

なので, $f_x + f \cdot f_y = Df$, $f_{xx} + 2f \cdot f_{xy} + f^2 f_{yy} = D^2 f$ と書くと

$$\hat{K}_2 = \frac{k_2 - k_1}{\varepsilon} = h^2 Df + \varepsilon \cdot \frac{h^3}{2} D^2 f + \dots = K_2 + \varepsilon \cdot \frac{h^3}{2} D^2 f + \dots$$

となるので, K_2 を \hat{K}_2 で代用したときの誤差は, m 進法 n 桁計算のとき,

$$\text{打ち切り誤差の主要項} : \varepsilon \cdot \frac{h^3}{2} D^2 f$$

$$\text{まるめの誤差} : 2 \cdot m^{-n} \cdot \frac{1}{\varepsilon} h f$$

なので全体での誤差を E とおくと

$$E = \varepsilon \cdot \frac{h^3}{2} D^2 f + 2 m^{-n} \cdot \frac{1}{\varepsilon} h f$$

である. この E を最小にする ε と, そのときの E は,

$$\varepsilon = 2 m^{-\frac{n}{2}} h^{-1} \sqrt{\frac{f}{D^2 f}}, \quad E = 2 m^{-\frac{n}{2}} h^2 \sqrt{f \cdot D^2 f}$$

である。すなわち $\hat{K}_2 \doteq h^2 Df$ の有効桁数は約半分である。

\hat{K}_2 の有効桁数はこのように計算桁数の約半分しかないが、大抵の問題ではこれで十分である。これはつぎのようにして示される。

y, Df, f, f_y, \dots の大きさは問題によって異なりわからないが、すべて 1 程度の大きさとするれば、 K_2 を \hat{K}_2 で置きかえて計算した k_i, y_{n+1} を \hat{k}_i, \hat{y}_{n+1} と書けば、

$$\begin{aligned} \hat{k}_3 &= h f(x + \alpha_3 h, y + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 + \beta_{32}\alpha_2 \hat{K}_2) \\ &\doteq h f(x + \alpha_3 h, y + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 + \beta_{32}\alpha_2 K_2 + \beta_{32}\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^2 \sqrt{f \cdot D^2 f}) \\ &\doteq h f(x + \alpha_3 h, y + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 + \beta_{32}\alpha_2 K_2) + \beta_{32}\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^3 \sqrt{f \cdot D^2 f} \cdot f_y \\ &= k_3 + \beta_{32}\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^3 \sqrt{f \cdot D^2 f} \cdot f_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{k}_4 &= h f(x + \alpha_4 h, y + (\beta_{41} + \beta_{42})k_1 + \beta_{42}\alpha_2 \hat{K}_2 + \beta_{43}\hat{k}_3) \\ &\doteq k_4 + \beta_{42}\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^3 \sqrt{f \cdot D^2 f} \cdot f_y + \beta_{43}\beta_{32}\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^4 \sqrt{f \cdot D^2 f} \cdot f_y^2 \\ &\doteq k_4 + \beta_{42}\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^3 \sqrt{f \cdot D^2 f} \cdot f_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{k}_5 &= h f(x + h, y + (\beta_{51} + \beta_{52})k_1 + \beta_{52}\alpha_2 \hat{K}_2 + \beta_{53}\hat{k}_3 + \beta_{54}\hat{k}_4) \\ &\doteq k_5 + \beta_{52}\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^3 \sqrt{f \cdot D^2 f} \cdot f_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+1} &= y_n + (\mu_1 + \mu_2)k_1 + \mu_2\alpha_2 \hat{K}_2 + \mu_3\hat{k}_3 + \mu_4\hat{k}_4 + \mu_5\hat{k}_5 \\ &\doteq y_n + (\mu_1 + \mu_2)k_1 + \mu_2\alpha_2 K_2 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4 + \mu_5 k_5 \\ &\quad + \mu_2\alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^2 \sqrt{f \cdot D^2 f} + (\mu_3\beta_{32}\alpha_2 + \mu_4\beta_{42}\alpha_2 + \mu_5\beta_{52}\alpha_2) \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^3 \sqrt{f \cdot D^2 f} \cdot f_y \end{aligned}$$

$$\div y_{n+1} + \mu_2 \alpha_2 \cdot 2m^{-\frac{n}{2}} h^2 \sqrt{f \cdot D^2 f}$$

となる。一方公式の誤差は f, Df, \dots がすべて 1 程度の大きさのときには、 $O(h^6)$ の誤差は h^6 程度の大きさと考えられる。従って \hat{y}_{n+1} に含まれる誤差が $O(h^6)$ の誤差より小さいとき、すなわち

$$\mu_2 \alpha_2 2m^{-\frac{n}{2}} h^2 < h^6, \quad h > m^{-\frac{n}{8}} \sqrt[4]{\frac{3}{50}} \quad (16 \text{ 進 } 14 \text{ 桁で約 } 0.0038)$$

をみたす h については、数値微分の誤差は、公式の $O(h^6)$ の誤差の範囲内に入ってしまう、公式の精度には影響しない。

つぎに ε のとり方について考える。

$f, D^2 f$ の大きさをほぼ同程度の大きさとすれば最適な ε は

$$\varepsilon = 2m^{-\frac{n}{2}} h^{-1} \sqrt{\frac{f}{D^2 f}} \div 2m^{-\frac{n}{2}} h^{-1}$$

にとればよいことになる。 h は f の性質の悪いもの ($D^2 f, \dots$ が大きい) に対しては小さく、性質の良いものに対しては大きくするのが普通である。性質の良いものは数値微分の打ち切り誤差は小さく、さるめの誤差の方が大きく浮び上がってくるから、 ε は大きめの方が良い。一方性質の悪いものは、 ε を大きめにすると、数値微分の誤差はますます大きくなるが、公式の $O(h^6)$ の誤差項も大きいと考えられるので、この誤差の範囲内に入ってしまう、公式の精度には影響しないと考えられる。通常の h は $0.01 \div 2^{-6.6}$ から $0.1 \div 2^{-3.3}$ 程度なので $h = 2^{-5}$ とする。

$$\varepsilon = 2 m^{-\frac{n}{2}} h^{-1} = 2^6 m^{-\frac{n}{2}}$$

に決める. 16進法の計算で

$$n = 14 \text{ (倍精度) のとき } \varepsilon = 2^{-22} \doteq 2.4_{10} \cdot 10^{-7}$$

$$n = 6 \text{ (単精度) のとき } \varepsilon = 2^{-6} \doteq 1.6_{10} \cdot 10^{-2}$$

となる.

以上から, ここで得られた公式は5段公式で, しかも打ち切り誤差は $O(h^5)$ の誤差項の係数がすべて0である5次極限公式と殆んど同じである.

微係数を用いない5段5次型公式は次の通りである.

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f(x_n + \varepsilon h, y_n + \varepsilon k_1), \quad \hat{K}_2 = \frac{k_2 - k_1}{\varepsilon}$$

$$k_3 = h f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{8}\hat{K}_2)$$

$$k_4 = h f(x_n + \frac{5}{9}h, y_n + \frac{305}{729}k_1 + \frac{125}{1458}\hat{K}_2 + \frac{100}{729}k_3)$$

$$k_5 = h f(x_n + h, y_n + \frac{359}{775}k_1 + \frac{7}{310}\hat{K}_2 - \frac{100}{31}k_3 + \frac{2916}{775}k_4)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{233}{750}k_1 + \frac{3}{100}\hat{K}_2 - \frac{8}{15}k_3 + \frac{2187}{2000}k_4 + \frac{31}{240}k_5$$

ここで ε は m 進法 n 桁計算のとき

$$\varepsilon = 2^6 m^{-\frac{n}{2}}$$

である. 16進法の場合 $n = 14$ (倍精度計算)のとき 2^{-22} , $n = 6$ (単精度計算)のとき 2^{-6} である.

3.4 連立型の場合.

○(45) の誤差項のうち, δ_{56} が二つに分れ

$$\delta_{56}^{(1)} = \sum_{i=4}^p \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k - \frac{1}{40} = T_3 \alpha_3 C_3 + T_4 \alpha_4 C_4 - \frac{1}{40}$$

$$\delta_{56}^{(2)} = \sum_{i=4}^p \mu_i \alpha_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k - \frac{1}{30}$$

となる.

$\alpha_5 = 1$ のとき, (2.2), (2.3), (2.5), (2.4), (2.6) 式から

$$(T_3 - \mu_3(1 - \alpha_3)) \alpha_3 (\alpha_3 - \alpha_2) + (T_4 - \mu_4(1 - \alpha_4)) \alpha_4 (\alpha_4 - \alpha_2) = 0$$

(2.4), (2.7), (2.8) 式から

$$(T_3 - \mu_3(1 - \alpha_3)) C_3 + (T_4 - \mu_4(1 - \alpha_4)) C_4 = 0$$

が得られる. この二つの式から

$$\begin{vmatrix} \alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2) & \alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2) \\ C_3 & C_4 \end{vmatrix} \neq 0$$

のとき,

$$T_3 = \mu_3(1 - \alpha_3), \quad T_4 = \mu_4(1 - \alpha_4)$$

となる.

δ_{52} から (2.7) 式を引いたものに, この関係を用いると

$$-\frac{1}{2} \left\{ \mu_3(1 - \alpha_3) \alpha_3 C_3 + \mu_4(1 - \alpha_4) \alpha_4 C_4 - \frac{1}{40} \right\}$$

$$= -\frac{1}{2} \left\{ T_3 \alpha_3 C_3 + T_4 \alpha_4 C_4 - \frac{1}{40} \right\} = -\frac{1}{2} \delta_{56}^{(1)}$$

となり, $\delta_{52} = 0$ のとき $\delta_{56}^{(1)}$ も 0 になる. 従って連立型の場合にも, 5 次極限公式従って 5 段 5 次型公式も成り立つ.

4. 6段公式

4.1 Luther, Konen の条件のもとでの Kutta の条件式.

$\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j = \frac{\alpha_i^2}{2}$ の条件のもとで, $O(h^5)$ までの誤差項の係数を 0 とおいた方程式を適当に組み合わせて整理する. それと Kutta の条件式が f に無関係になりたつための条件式は次のようになる.

$$\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} = \alpha_i, \quad (i=2, \dots, 6)$$

$$\sum_{i=1}^6 \mu_i = 1$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 & \alpha_6 \\ \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 & \alpha_6^2 \\ \alpha_3^3 & \alpha_4^3 & \alpha_5^3 & \alpha_6^3 \\ \alpha_3^4 & \alpha_4^4 & \alpha_5^4 & \alpha_6^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 \\ \alpha_3^3 & \alpha_4^3 & \alpha_5^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_4 \beta_{43} + \mu_5 \beta_{53} + \mu_6 \beta_{63} \\ \mu_5 \beta_{54} + \mu_6 \beta_{64} \\ \mu_6 \beta_{65} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{12} \\ \frac{1}{20} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_4 \alpha_4 \beta_{43} + \mu_5 \alpha_5 \beta_{53} + \mu_6 \alpha_6 \beta_{63} \\ \mu_5 \alpha_5 \beta_{54} + \mu_6 \alpha_6 \beta_{64} \\ \mu_6 \alpha_6 \beta_{65} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{8} \\ \frac{1}{15} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 \\ \alpha_3^2 & \alpha_4^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\mu_5 \beta_{54} + \mu_6 \beta_{64}) \beta_{43} + \mu_6 \beta_{65} \beta_{53} \\ \mu_6 \beta_{65} \beta_{54} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{24} \\ \frac{1}{60} \end{pmatrix}$$

これらの式から, α_i のみたさなければならない条件

$$(1-\alpha_6)(10\alpha_3^2\alpha_4-8\alpha_3\alpha_4-\alpha_3+2\alpha_4)=0$$

が得られる。Luther, Konen の条件から $\mu_2\alpha_2^2=0$ となるので、
 $\mu_2=0$ の場合について考える。

$\alpha_6=1$ の場合、 $O(h^6)$ のすべての誤差項の係数を 0 にする
 6 次の極限公式が導かれる³⁾。 $10\alpha_3^2\alpha_4-8\alpha_3\alpha_4-\alpha_3+2\alpha_4=0$ の場
 合は、 $\alpha_6=1$ の極限公式の特別の場合となり、 $O(h^7)$ の誤差
 項の係数の大きさからみて、 $\alpha_6=1$ で導いた極限公式よりよ
 い公式は得られない。

4.2 6 次極限公式³⁾

$\alpha_6=1$ のとき、 $\alpha_2 \rightarrow 0$ かつ $\alpha_5 \rightarrow 1$ の極限公式が得られ、
 $O(h^7)$ の誤差項の係数からみて最もよいのは次の公式である。

$$k_1 = h f(x, y)$$

$$K_2 = h^2 (f_x + f \cdot f_y)$$

$$k_3 = h f(x + \alpha_3 h, y + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 + \beta_{32}\alpha_2 K_2)$$

$$k_4 = h f(x + \alpha_4 h, y + (\beta_{41} + \beta_{42})k_1 + \beta_{42}\alpha_2 K_2 + \beta_{43}k_3)$$

$$k_6 = h f(x + h, y + (\beta_{61} + \beta_{62})k_1 + \beta_{62}\alpha_2 K_2 + \beta_{63}k_3 + \beta_{64}k_4)$$

$$K_5 = -h^2 f_x + h f_y \cdot \left(\left(\frac{\beta_{51} - \beta_{61}}{1 - \alpha_5} + \frac{\beta_{52} - \beta_{62}}{1 - \alpha_5} \right) k_1 + \frac{\beta_{52} - \beta_{62}}{1 - \alpha_5} \alpha_2 K_2 + \frac{\beta_{53} - \beta_{63}}{1 - \alpha_5} k_3 \right. \\ \left. + \frac{\beta_{54} - \beta_{64}}{1 - \alpha_5} k_4 + \frac{-\beta_{65}}{1 - \alpha_5} k_6 \right)$$

$$y_{n+1} = y_n + \mu_1 k_1 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4 + (\mu_5 + \mu_6) k_6 + \mu_5 (1 - \alpha_5) K_5$$

ここでパラメータは次の通りである。

$$\alpha_3 = \frac{1}{5}, \quad \beta_{31} + \beta_{32} = \frac{1}{5}, \quad \beta_{32}\alpha_2 = \frac{1}{50}$$

$$\alpha_4 = \frac{3}{5}, \quad \beta_{41} + \beta_{42} = -\frac{7}{5}, \quad \beta_{42}\alpha_2 = -\frac{11}{50}, \quad \beta_{43} = 2$$

$$\beta_{61} + \beta_{62} = 21, \quad \beta_{62}\alpha_2 = \frac{19}{6}, \quad \beta_{63} = -\frac{70}{3}, \quad \beta_{64} = \frac{10}{3}$$

$$\frac{\beta_{51}-\beta_{61}}{1-\alpha_5} + \frac{\beta_{52}-\beta_{62}}{1-\alpha_5} = -\frac{946}{3}, \quad \frac{\beta_{52}-\beta_{62}}{1-\alpha_5}\alpha_2 = -\frac{143}{3}, \quad \frac{\beta_{53}-\beta_{63}}{1-\alpha_5} = \frac{2135}{6},$$

$$\frac{\beta_{54}-\beta_{64}}{1-\alpha_5} = -\frac{85}{2}, \quad \frac{-\beta_{65}}{1-\alpha_5} = 1$$

$$\mu_1 = \frac{1}{18}, \quad \mu_3 = \frac{125}{384}, \quad \mu_4 = \frac{125}{288}, \quad \mu_5 + \mu_6 = \frac{71}{384}, \quad \mu_5(1-\alpha_5) = \frac{1}{96}$$

4.3 微係数を用いない6段6次型公式.

5段公式の場合と同様に, K_2 の代りに

$$k_1 = h f(x, y)$$

$$k_2 = h f(x + \varepsilon h, y + \varepsilon k_1), \quad \hat{K}_2 = \frac{k_2 - k_1}{\varepsilon}$$

を用いる. また K_5 については次のようにして \hat{K}_5 で計算する.

$$k_5 = h f(x + \alpha_5 h, y + (\beta_{51} + \beta_{52})k_1 + \beta_{52}\alpha_2 \hat{K}_2 + \beta_{53}k_3 + \beta_{54}k_4)$$

の ~~~~ の部分を, $(1-\alpha_5) = \varepsilon$ として

$$\begin{aligned} & y + (\beta_{61} + \beta_{62})k_1 + \left(\frac{\beta_{51}-\beta_{61}}{1-\alpha_5} + \frac{\beta_{52}-\beta_{62}}{1-\alpha_5} \right) (1-\alpha_5)k_1 \\ & + \beta_{62}\alpha_2 \hat{K}_2 + \frac{\beta_{52}-\beta_{62}}{1-\alpha_5} (1-\alpha_5)\alpha_2 \hat{K}_2 \\ & + \beta_{63}k_3 + \frac{\beta_{53}-\beta_{63}}{1-\alpha_5} (1-\alpha_5)k_3 \\ & + \beta_{64}k_4 + \frac{\beta_{54}-\beta_{64}}{1-\alpha_5} (1-\alpha_5)k_4 + \frac{-\beta_{65}}{1-\alpha_5} (1-\alpha_5)k_6 \\ & = y + (\beta_{61} + \beta_{62})k_1 + \beta_{62}\alpha_2 \hat{K}_2 + \beta_{63}k_3 + \beta_{64}k_4 \\ & + \varepsilon \left\{ \left(\frac{\beta_{51}-\beta_{61}}{1-\alpha_5} + \frac{\beta_{52}-\beta_{62}}{1-\alpha_5} \right) k_1 + \frac{\beta_{52}-\beta_{62}}{1-\alpha_5} \alpha_2 \hat{K}_2 + \frac{\beta_{53}-\beta_{63}}{1-\alpha_5} k_3 + \frac{\beta_{54}-\beta_{64}}{1-\alpha_5} k_4 + \frac{-\beta_{65}}{1-\alpha_5} k_6 \right\} \end{aligned}$$

と変形して計算し, K_5 の値として

$$\hat{K}_5 = \frac{k_5 - k_6}{\varepsilon}$$

を用いる.

微係数を用いない6段6次型公式は次の通りである.

$$k_1 = h f(x, y)$$

$$k_2 = h f(x + \varepsilon h, y + \varepsilon k_1), \quad \hat{K}_2 = \frac{k_2 - k_1}{\varepsilon}$$

$$k_3 = h f(x + \frac{1}{5}h, y + \frac{1}{5}k_1 + \frac{1}{50}\hat{K}_2)$$

$$k_4 = h f(x + \frac{3}{5}h, y - \frac{7}{5}k_1 - \frac{11}{50}\hat{K}_2 + 2k_3)$$

$$y_p = y + 21k_1 + \frac{19}{6}\hat{K}_2 - \frac{70}{3}k_3 + \frac{10}{3}k_4$$

$$k_6 = h f(x + h, y_p)$$

$$k_5 = h f(x + (1-\varepsilon)h, y_p + \varepsilon(-\frac{946}{3}k_1 - \frac{143}{3}\hat{K}_2 + \frac{2135}{6}k_3 - \frac{85}{2}k_4 + k_6))$$

$$\hat{K}_5 = \frac{k_5 - k_6}{\varepsilon}$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{18}k_1 + \frac{125}{384}k_3 + \frac{125}{288}k_4 + \frac{71}{384}k_6 + \frac{1}{96}\hat{K}_5$$

ここで ε は, 16進法の場合倍精度計算で 2^{-22} , 単精度のとき 2^{-6} である.

6段公式の場合も, 5段公式の場合と同様に

$$\frac{1}{96} \cdot 2 m^{-\frac{n}{2}} h^2 < h^7, \quad h > m^{-\frac{n}{10}} \sqrt[5]{\frac{1}{48}} \quad (16進14桁で約0.0095)$$

をみたす h に対しては, 極限公式とほぼ同じ精度となる.

4.4 連立型の場合.

$O(R^5)$ の誤差項の係数 δ_{56} については $\delta_{56}^{(1)}, \delta_{56}^{(2)}$ は共に0となる.

$O(R^6)$ の誤差項の係数のうち $\delta_{67}, \delta_{68}, \delta_{610}, \delta_{613}$ は2乃至3式に分れ, それぞれ次のようになる.

$$\begin{aligned}\delta_{67}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^6 \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 - \frac{1}{90} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_2(3-5\alpha_5)}{120} + \frac{\alpha_2(10\alpha_3\alpha_5-5(\alpha_3+\alpha_5)+3)}{180\alpha_3(5\alpha_3-2)} + \frac{(\alpha_5-1)(5\alpha_3-1)}{180(5\alpha_3-2)} \right) \\ &= \frac{15\alpha_5-11}{720} \alpha_2\end{aligned}$$

$$\delta_{67}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^6 \mu_i \alpha_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 - \frac{1}{72} \right) = \frac{1}{2} \cdot \frac{\alpha_2(1-3\alpha_3)}{360\alpha_3} = \frac{1}{360} \alpha_2$$

$$\delta_{68}^{(1)} = \sum_{i=5}^6 \mu_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l - \frac{1}{240} = \frac{-5\alpha_3\alpha_4+2(\alpha_3+\alpha_4)-1}{240} = 0$$

$$\begin{aligned}\delta_{68}^{(2)} &= \sum_{i=5}^6 \mu_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l - \frac{1}{180} \\ &= \frac{(\alpha_5-1)(1-5\alpha_3)}{360(2-5\alpha_3)} = 0\end{aligned}$$

$$\delta_{68}^{(3)} = \sum_{i=5}^6 \mu_i \alpha_i \sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l - \frac{1}{144} = 0$$

$$\begin{aligned}\delta_{610}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^6 \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k - \frac{1}{60} \right) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{(1-(\alpha_3+\alpha_4))(\alpha_5-1)}{120} = -\frac{1}{1200} (1-\alpha_5)\end{aligned}$$

$$\delta_{610}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^6 \mu_i \alpha_i^2 \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k - \frac{1}{36} \right) = \frac{1}{2} \cdot \frac{(5\alpha_3-1)(\alpha_5-1)}{360(2-5\alpha_3)} = 0$$

$$\begin{aligned}\delta_{613}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=4}^6 \mu_i \sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \right)^2 - \frac{1}{120} \right) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{(1-(\alpha_3+\alpha_4))(\alpha_5-1)}{240} = -\frac{1}{2400} (1-\alpha_5)\end{aligned}$$

$$\delta_{613}^{(2)} = \sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right) \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \right) - \frac{1}{72} = \frac{(5\alpha_3-1)(\alpha_5-1)}{720(2-5\alpha_3)} = 0$$

これらのうち 0 でない $\delta_{67}^{(1)}$, $\delta_{67}^{(2)}$, $\delta_{610}^{(1)}$, $\delta_{613}^{(1)}$ は, $\alpha_2 = 1 - \alpha_5 = 0$ のとき 0 となるので, 6 次極限公式従って 6 段 6 次型公式は連立型の方程式に対してもなりたつことがわかる.

因に $\alpha_2 = 1 - \alpha_5 = 2^{-22}$ のとき, これらの値は

$$\delta_{67}^{(1)} \div .13_{10}-8, \quad \delta_{67}^{(2)} \div .66_{10}-9, \quad \delta_{610}^{(1)} \div -.20_{10}-9, \quad \delta_{613}^{(1)} \div .99_{10}-10$$

であって, 誤差項の係数としては 0 と見做せることがわかる.

5. 安定性

公式の絶対安定領域を微分方程式 $y' = \lambda y$ を用いて求めると

$$f_y = \lambda, \quad Df = f_x + f \cdot f_y = \lambda^2 y, \quad D^2 f = f_{xx} + 2f \cdot f_{xy} + f^2 \cdot f_{yy} = 0$$

なので, $O(h^p)$ の誤差項は, $Df \cdot f_y^{p-2}$ の項だけである. Kutta 型公式の $Df \cdot f_y^{p-2}$ の項の係数は

$$\mu_p \beta_p, p-1 \beta_{p-1, p-2} \cdots \beta_{32} \alpha_2 - \frac{1}{p!}$$

である. ここで導いた公式では 0 なので, 田中⁵⁾に従って

$$p! \mu_p \beta_p, p-1 \beta_{p-1, p-2} \cdots \beta_{32} \alpha_2 = \gamma_p$$

とおけば, $\gamma_p = 1$ で, 絶対安定領域は

$$1 + \lambda h + \frac{(\lambda h)^2}{2!} + \cdots + \frac{(\lambda h)^p}{p!} - (-1)^p = 0$$

の実数解から

$$5 \text{ 段公式: } -3.21 < \lambda h < 0$$

$$6 \text{ 段公式: } -3.55 < \lambda h < 0$$

と求められる.

6. 数値例

普通の数値例では， $O(h^{p+1})$ の誤差項がちょうど 0 になるような例はまれで，そのような特別な例を除いて，実行したすべての例で， p 次極限公式 ($O(h^p)$ の誤差項の係数は完全に 0) との差は，極限公式の誤差の範囲内にあり， p 次公式といえることがわかる．

1) 普通の方程式の例

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{x^2 y^2}{3}, \quad y(2) = 1, \quad h = 0.1$$

X = 2.10	Y	Y-Y(X)	5次型公式-極限公式	
極限公式	0.8771074046819738	-0.8971D-07		DF2= 0.222222222222222D-01
5次型公式	0.8771074046888794	-0.8971D-07	0.6906E-11	K2P= 0.222222252748907D-01
X = 7.00				
極限公式	0.2616278953825000D-01	-0.1159D-08		DF2= 0.6832138989639083D-04
5次型公式	0.2616278953865622D-01	-0.1159D-08	0.4062E-12	K2P= 0.6832138933532406D-04
X = 2.10			6次型公式-極限公式	
極限公式	0.8771074972738272	0.2878D-08		DF2= 0.222222222222222D-01
6次型公式	0.8771074972757894	0.2880D-08	0.1962E-11	K2P= 0.222222252748907D-01
				DF5=-0.1752140156237076D-01
				K5P=-0.1752139721065760D-01
X = 7.00				
極限公式	0.2616279072453053D-01	0.2686D-10		DF2= 0.6832140118639094D-04
6次型公式	0.2616279072461562D-01	0.2694D-10	0.8509E-13	K2P= 0.6832140184087621D-04
				DF5=-0.6336011729703833D-04
				K5P=-0.6336011460916779D-04

2) $O(h^{p+1})$, $p=5, 6$ の誤差がちょうど 0 になる例²⁾

$$y' = f(x, y) = \frac{2y}{1+x}$$

この方程式について，導関数を計算すると

$$D^k f = (-1)^{k+1} \frac{2k! y}{(1+x)^{k+1}}, \quad D^k f_y = (-1)^k \frac{2k!}{(1+x)^{k+1}}, \quad f_y = \frac{2}{1+x}$$

である．ここで述べた 5 段 5 次型公式を導くのに用いた 5 次極限公式について， $O(h^6)$ の誤差項を計算すると

$$\Delta_{61} = \frac{1}{32400} \cdot D^5 f = \frac{1}{135} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}, \quad \Delta_{62} = -\frac{1}{6480} \cdot D^4 f \cdot f_y = \frac{2}{135} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}$$

$$\Delta_{63} = 0 \cdot D^3 f \cdot f_y^2 = 0, \quad \Delta_{64} = -\frac{1}{720} \cdot D^2 f \cdot f_y^3 = \frac{2}{45} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}$$

$$\Delta_{65} = -\frac{1}{720} \cdot D f \cdot f_y^4 = -\frac{2}{45} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}, \quad \Delta_{66} = 0 \cdot D^3 f \cdot D f_y = 0$$

$$\Delta_{67} = \frac{1}{2160} \cdot D^2 f \cdot D f_y \cdot f_y = \frac{1}{135} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}, \quad \Delta_{68} = \frac{1}{2160} \cdot D f \cdot D f_y \cdot f_y^2 = -\frac{1}{135} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}$$

$$\Delta_{69} = \frac{1}{3240} \cdot D^3 f_y \cdot D f = -\frac{1}{135} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}, \quad \Delta_{610} = -\frac{1}{2160} \cdot D^2 f_y \cdot D f \cdot f_y = -\frac{1}{135} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}$$

$$\Delta_{611} = \frac{1}{2160} \cdot D^2 f_y \cdot D^2 f = -\frac{1}{135} \cdot \frac{y}{(1+x)^6}, \quad \Delta_{612} = \frac{1}{2160} \cdot D^2 f \cdot D f \cdot f_{yy} = 0$$

$$\Delta_{613} = 0 \cdot (D f)^2 \cdot f_y \cdot f_{yy} = 0, \quad \Delta_{614} = \frac{1}{2160} \cdot D f_{yy} \cdot (D f)^2 = 0$$

$$\Delta_{615} = 0 \cdot (D f_y)^2 \cdot D f = 0$$

である．従って，

$$\sum_{i=1}^{15} \Delta_{6i} = 0$$

になる。同じ5次の極限公式でも，自由なパラメタの選び方を変えたものやii)型では0にはならない(B-i)型では -1.10^{-6} である)

6次の誤差がちょうど0なので，この例にここで導いた5段5次型公式を用いると，数値微分による誤差がそのまま公式の誤差となる。 $\alpha_2 = 1 - \alpha_5 = \varepsilon$ であるために残る $O(h^5), O(h^6)$ の誤差は，数値微分による誤差のほぼ 10^{-2} 程度の大きさである。6段6次型公式についても，この例では全く同様の現象が起る。

$$\frac{dY}{dX} = \frac{2Y}{1+X}, \quad Y(0) = 1, \quad h = 0.1$$

X = 0.100		Y	Y - Y(X)	5次型公式-極限公式
極限公式	1.2100000000000000		0.4441D-15	DF2= 0.2000000000000000D-01
5次型公式	1.209999999975553		-0.2445D-10	K2P= 0.1999999932013452D-01
X = 8.00				
極限公式	80.99999999999968		-0.3233D-12	DF2= 0.199999999999992D-01
5次型公式	80.99999999221187		-0.7788D-08	K2P= 0.1999999955296516D-01

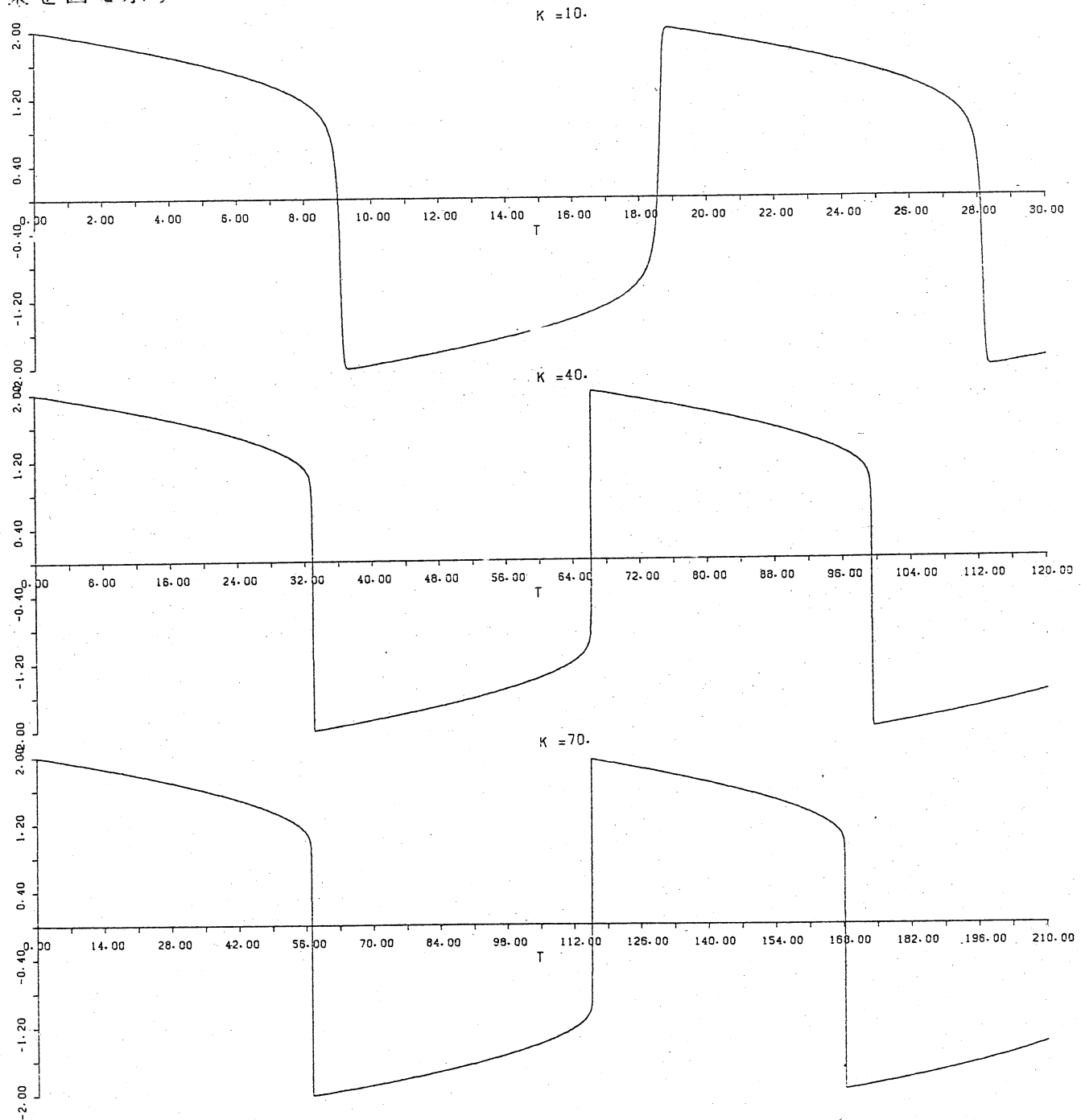
X = 0.100		Y	Y - Y(X)	6次型公式-極限公式
極限公式	1.2100000000000000		0.4441D-15	DF2= 0.2000000000000000D-01
6次型公式	1.209999999992628		-0.7371D-11	K2P= 0.1999999932013452D-01
				DF5=-0.199999999999883D-01
				K5P=-0.1999999530380592D-01
X = 8.00				
極限公式	80.99999999999970		-0.3055D-12	DF2= 0.199999999999992D-01
6次型公式	80.99999999728218		-0.2718D-08	K2P= 0.2000000048428774D-01
				DF5=-0.200000000000128D-01
				K5P=-0.2000000048428774D-01

3) 連立型の方程式の例

Van der Pol の方程式

$$\frac{d^2 y}{d t^2} = -k(y^2 - 1) \frac{d y}{d t} - y, \quad y(0) = 2, \quad \left. \frac{d y}{d t} \right|_{t=0} = 0, \quad h = 0.01$$

6 段 6 次型公式により $k = 10$ から 10 刻みで増して 70 まで計算した結果を図で示す。



4) 固い方程式の例⁵⁾

$$\frac{dy}{dx} = 100 (\sin x - y), \quad y(0) = 0, \quad h = 0.02$$

X	Y	Y-Y(X)	5次型公式-極限公式
X = 0.200D-01			
極限公式	0.1066617778545398D-01	-0.6867D-03	DF2= 0.4000000000000000D-01
5次型公式	0.1066617778545398D-01	-0.6867D-03	0.0 K2P= 0.3999999999999999D-01

X = 0.600			
極限公式	0.5563334038353878	-0.8006D-07	DF2=-0.2161664493640769D-03
5次型公式	0.5563334038329613	-0.8006D-07 -0.2427E-11	K2P=-0.2161663724109530D-03

X	Y	Y-Y(X)	6次型公式-極限公式
X = 0.200D-01			
極限公式	0.1155507852542099D-01	0.2022D-03	DF2= 0.4000000000000000D-01
6次型公式	0.1155507852549100D-01	0.2022D-03 0.7001E-13	K2P= 0.3999999999999999D-01
			DF5= 0.6213155911251417
			K5P= 0.6213155911318609
X = 0.600			
極限公式	0.5563334958160904	0.1192D-07	DF2=-0.2157938824054595D-03
6次型公式	0.5563334958215191	0.1192D-07 0.5429E-11	K2P=-0.2157938433811069D-03
			DF5= 0.2574612362255157D-03
			K5P= 0.2574761165305972D-03

7. 結論

Kutta 型公式で5段公式と6段公式について、 f_x と f_y を用いれば、5次の極限公式と6次の極限公式が得られる。これは5段公式で1個の関数計算の代りに2個の導関数の計算が必要となり、6段公式では2個の関数計算の代りに4個の導関数の計算が必要で、関数計算の手間からいえば、6段公式

および8段公式に等しい。ここで報告した5段5次型および6段6次型の公式は、極限公式のままなので係数は簡単な有理数で $O(h^5)$, $O(h^6)$ の誤差項の係数はほぼ0になる。そして、微係数を数値微分でおきかえたための誤差も公式の打ち切り誤差の範囲内にあるので、 $O(h^6)$, $O(h^7)$ の誤差がちょうど0となるような特殊な例を除けば、5段で5次、6段で6次といえる、実用的な公式と思われる。

参 考 文 献

- 1) Kutta, W.: Beitrag zur naeherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen, Z. Math. Phys., 46, pp.435-453 (1901).
- 2) 戸田英雄: Runge-Kutta 系のある極限公式の打ち切り誤差について, 情報処理学会論文誌, Vol.21, No.4, pp.285-296 (1980).
- 3) 小野令美, 戸田英雄: 6個の関数計算による実質的6次のRunge-Kutta法, 情報処理学会論文誌, Vol.23, No.6, pp.599-607 (1982).
- 4) 戸田英雄, 小野令美: 5個の関数計算による実質的に5次のRunge-Kutta法, 情報処理学会論文誌, Vol.22, No.2, pp.89-98 (1981).

- 5) 田中正次, 若林晴彦, 山下茂: 5 段数陽的Runge-Kutta 法の安定性と打ち切り精度の関係について, 京都大学数理解析研究所講究録483, pp.112~130 (1983).
- 6) Luther, H.A. and Konen, H.P.: Some Fifth-order Classical Runge-Kutta Formulas, SIAM Rev., Vol.7, No.4, Oct., pp.551-558 (1965).
- 7) 田中正次, 山下茂, 田名後保彦, 尾崎実: 5 次陽的Runge-Kutta 法の特性の比較と最適化, 京都大学数理解析研究所講究録422, pp.37~58(1981).
- 8) Cassity, C.R.: Solutions of the Fifth-order Runge-Kutta Equations, SIAM J. Num. Anal., Vol.3, No.4, pp.598-606 (1966).
- 9) Cassity, C.R.: The complete Solution of the Fifth-order Runge-Kutta Equations, SIAM J. Num. Anal., Vol.6, No.3, pp.432-436(1969).